NAG Fortran Library, Mark 26 FLW3226DEL - License Managed Microsoft Windows, 32-bit, Intel Fortran

<u>ユーザーノート</u>

内容

1. イントロダクション	1
2. 追加情報	1
3. 一般情報	2
3.1. ライブラリのリンク方法	4
3.1.1. コマンドウィンドウ	6
3.1.2. Microsoft Visual Studio	8
3.1.3. モジュールファイルについて	12
3.1.4. Microsoft C/C++ または Intel C/C++	13
3.1.5. Fortran Builder	16
3.1.6. その他の環境	18
3.2. インターフェースブロック	19
3.3. Example プログラム	21
3.4. Fortran 型と強調斜体文字の解釈	23
3.5. メンテナンスレベル	24
4. ルーチン固有の情報	25
5. ドキュメント	29
6. サポート	31
7. コンタクト情報	31

1. イントロダクション

本ユーザーノートは, NAG Fortran Library, Mark 26 - FLW3226DEL(ライブラリ)の ご利用方法(リンク方法)を説明します.

本ユーザーノートには, NAG Library Manual, Mark 26 (ライブラリマニュアル) には含 まれない製品毎の情報が含まれています. ライブラリマニュアルに「ユーザーノート参 照」などと書かれている場合は, 本ユーザーノートをご参照ください.

ライブラリルーチンのご利用に際しては、ライブラリマニュアル(「5. ドキュメント」 参照)の以下のドキュメントをお読みください.

- (a) How to Use the NAG Library and its Documentation
- (b) Chapter Introduction
- (c) Routine Document

2. 追加情報

本ライブラリの動作環境やご利用方法についての最新の情報は、以下のウェブページを ご確認ください.

http://www.nag.co.uk/doc/inun/fl26/w32del/supplementary.html

3. 一般情報

本ライブラリは, Intel ® Math Kernel Library for Windows (MKL) が提供する BLAS/ LAPACK ルーチンを利用するライブラリ(スタティック版と DLL 版)と, NAG が提供する BLAS/LAPACK ルーチンを利用するライブラリ(スタティック版と DLL 版)を提供します.

本ライブラリは, MKL version 11.3.3 を用いてテストされています. MKL version 11.3.3 は本製品の一部として提供されます. MKL の詳細については Intel 社のウェブサイト <u>https://software.intel.com/intel-mkl</u> をご参照ください.

パフォーマンスの面からは, MKL を利用するバージョンの NAG ライブラリ nag_mkl_MT.lib, nag_mkl_MD.lib, FLW3226DE_mkl.lib/FLW3226DE_mkl.dll のご利用を 推奨します.これらのライブラリは NAG が提供する BLAS/LAPACK ルーチンを含みません.

また, MKL を利用しないバージョンの NAG ライブラリ nag_nag_MT. lib, nag_nag_MD. lib, FLW3226DE_nag. lib/FLW3226DE_nag. dll が提供されます. これらのライブラリは NAG が 提供する BLAS/LAPACK ルーチンを含んでいます.

NAG ライブラリのスタティック版をご利用の場合は、共にリンクされる Microsoft ランタ イムライブラリに従って、NAG ライブラリを選択する必要があります. マルチスレッドス タティックランタイムライブラリと共にリンクする場合は、nag_mkl_MT. lib または nag_nag_MT. lib をご利用ください. または、マルチスレッド DLL ランタイムライブラリ と共にリンクする場合は、nag_mkl_MD. lib または nag_nag_MD. lib をご利用ください.

NAG ライブラリの DLL 版をご利用の場合は, インポートライブラリ FLW3226DE_mkl. | ib または FLW3226DE_nag. | ib をリンクしてください. 実行時には, 対応する DLL ファイル FLW3226DE_mkl. dll または FLW3226DE_nag. dll の格納フォルダーのパスが環境変数 PATH に設定されている必要があります. 詳細は「3.1.1. コマンドウィンドウ」をご参照ください.

本製品で提供される MKL version 11.3.3 はマルチスレッド化されており,環境変数 OMP_NUM_THREADS が設定されていない場合,複数のプロセッサまたはマルチコアチップを 持つシステムでは,計算速度の向上のためにマルチスレッドで計算を行います.もし, MKL に複数のプロセッサまたはコアを使わせたくない場合は,環境変数 OMP_NUM_THREADS に "1"(もしくは,必要なスレッド数)を設定してください.なお,X06 ルーチンは MKL のスレッドの振る舞いに影響を与えません. MKL には、条件付きビット単位の再現性(Bit-wise Reproducibility (BWR))オプション があります.一定の条件(<u>https://software.intel.com/en-us/node/528579</u>参照)をユ ーザーコードが満たしていれば、環境変数 MKL_CBWR を設定することにより BWR が有効に なります.詳細は MKL のドキュメントをご参照ください.しかしながら、多くの NAG ル ーチンはこれらの条件を満たしていません.従って、MKL を利用するバージョンの NAG ラ イブラリの全ルーチンに対して、異なる CPU アーキテクチャに渡り MKL_CBWR による BWR を保証することはできません. BWR に関するより一般的な情報は、"How to Use the NAG Library and its Documentation"ドキュメントの「3.11.1 Bit-wise Reproducibility (BWR)」をご参照ください.

本ライブラリは、インストールノートの「2.1. 動作環境」に記載されているコンパイラ に適しています. なお、本ライブラリの DLL (FLW3226DE_mk1.dll と FLW3226DE_nag.dll) は Visual Basic や Excel などの他のパッケージや環境からの使用を想定していません. 詳細につきましては、上記「2. 追加情報」をご参照ください.

3.1. ライブラリのリンク方法

本ライブラリは、インストールノートの「2.2. 開発環境」に記載されているバージョン の Intel Fortran コンパイラを用いてビルドされました. 本ライブラリのビルドに用い た Intel Fortran コンパイラのランタイム DLL が install_dir¥rtl¥bin フォルダーに提 供されます. ご利用の Intel Fortran コンパイラのバージョンに依っては、プログラム の実行時に、このフォルダーにパスを通す必要があるかもしれません.

本セクションでは,以下のデフォルトのインストールフォルダーに本ライブラリがイン ストールされていることを前提とします.

C:\Program Files\NAG\FL26\flw3226del

(64-bit マシンでは, C:¥Program Files (x86)¥NAG¥FL26¥flw3226del)

もし, このフォルダーが存在しない場合は, システム管理者(本ライブラリをインスト ールされた方)にお尋ねください. 以降の説明ではこのフォルダーを install_dir とし て参照します.

また,スタートメニューの NAG Fortran Library (FLW3226DEL) に以下のライブラリコマ ンドプロンプトのショートカットが置かれていることを前提とします.

NAG FLW3226DEL Command Prompt

もし,このショートカットが存在しない場合は,システム管理者(本ライブラリをイン ストールされた方)にお尋ねください.また,本ライブラリのインストール時に作成さ れる他のショートカットも同じ場所に置かれていることを前提とします.

NAG DLL (FLW3226DE_mk1.dll/FLW3226DE_nag.dll) をご利用の場合は, 実行時に NAG DLL にアクセスできるように install_dir¥bin フォルダーにパスを通してください. また, 適切な Intel ランタイムライブラリにパスが通っていない場合は, install_dir¥rtl¥bin フォルダーにパスを通してください. また, MKL を利用する NAG DLL (FLW3226DE_mk1.dll) をご利用の場合は, install_dir¥mkl_ia32_11.3.3¥bin フォルダーにパスを通してくださ い. この時, install_dir¥mkl_ia32_11.3.3¥bin は install_dir¥bin の後ろに設定してく ださい. これは BLAS/LAPACK ルーチンのいくつかは, ベンダーバージョンとの問題を避 けるために, NAG バージョン (FLW3226DE_mk1.dll に含まれる) を使用する必要があるか らです. (「4. ルーチン固有の情報」参照)

NAG DLL へのアクセスをチェックするために、スタートメニューの NAG Fortran Library (FLW3226DEL) にある以下のショートカットから診断プログラム NAG_Fortran_DLL_info.exe を実行してください.

Check NAG FLW3226DEL DLL Accessibility

この診断プログラムの詳細については、インストールノートの「4.2.2. アクセスチェック」をご参照ください.

3.1.1. コマンドウィンドウ

本ライブラリをコマンドウィンドウからご利用になる場合は,環境変数の設定が必要で す.(なお,インストール時に環境変数の自動設定を選択された場合は,必要な環境変数 はシステム環境変数に既に設定されています.),スタートメニューの NAG Fortran Library (FLW3226DEL) にある以下のショートカットがご利用いただけます.

NAG FLW3226DEL Command Prompt

このショートカットは、本ライブラリと本製品で提供される MKL に対して必要な環境変数 INCLUDE, LIB, PATH を正しく設定した上でコマンドプロンプトを開きます. また, バッチファイル nag_example_*. bat が必要とする環境変数 NAG_FLW3226DEL も設定します.

このショートカットを利用しない場合は、環境変数の設定を手動で行う必要があります. 環境変数の設定はバッチファイル envvars.bat を用いて行うことができます. このバッ チファイルのデフォルトの格納位置を以下に示します.

C:\Program Files\NAG\FL26\flw3226del\batch\envvars.bat

その後,以下に示すコマンドの一つでコンパイル/リンクを行ってください. ここで driver.f90 がユーザープログラムです.いくつかのコマンドは紙面の都合により 二行で書かれていますが,実際は一行で打ち込んでください.

ifort /MT driver.f90 nag_mkl_MT.lib mkl_intel_c.lib mkl_intel_thread.lib mkl_core.lib libiomp5md.lib user32.lib

ifort /MT driver.f90 nag_nag_MT.lib user32.lib

ifort /MD driver.f90 nag_mkl_MD.lib mkl_intel_c.lib mkl_intel_thread.lib mkl_core.lib libiomp5md.lib user32.lib

ifort /MD driver.f90 nag_nag_MD.lib user32.lib

ifort /MD driver.f90 FLW3226DE_mkl.lib

ifort /MD driver.f90 FLW3226DE_nag.lib

指定するライブラリの順番は重要です. これは BLAS / LAPACK ルーチンのいくつかはベン ダーバージョンとの問題を避けるために NAG バージョンを使用する必要があるからです. (「4. ルーチン固有の情報」参照)

最初の2つのコマンドは /MT オプションでコンパイルされた NAG スタティックライブラ リを利用する場合です. 1番目のコマンドは, NAG の BLAS/LAPACK を含まない (MKL の BLAS/LAPACK を利用する) NAG スタティックライブラリ nag_mkl_MT. lib を利用する場合 です. (注: Intel コンパイラの新しいバージョンには, OMP ランタイムライブラリの MT バージョン libiomp5mt. lib はありません. 代わりに, libiomp5md. lib をリンクする必要 があります.) 2番目のコマンドは, NAG の BLAS/LAPACK を含む NAG スタティックライブ ラリ nag_nag_MT. lib を利用する場合です. /MT オプションは正しいランタイムライブラ リ (マルチスレッドスタティックランタイムライブラリ) とのリンクを指示するために 必要です.

3番目と4番目のコマンドは /MD オプションでコンパイルされた NAG スタティックライ ブラリを利用する場合です. 3番目のコマンドは, NAG の BLAS/LAPACK を含まない (MKL の BLAS/LAPACK を利用する) NAG スタティックライブラリ nag_mk1_MD. lib を利用する場 合です. 4番目のコマンドは, NAG の BLAS/LAPACK を含む NAG スタティックライブラリ nag_nag_MD. lib を利用する場合です. /MD オプションは正しいランタイムライブラリ (マ ルチスレッド DLL ランタイムライブラリ) とのリンクを指示するために必要です.

最後の2つのコマンドは /MD オプションでコンパイルされた NAG DLL インポートライブ ラリを利用する場合です. 5番目のコマンドは, NAG の BLAS/LAPACK を含まない (MKL の BLAS/LAPACK を利用する) NAG DLL (FLW3226DE_mk1.dll) を利用する場合です. NAG DLL インポートライブラリ FLW3226DE_mk1.lib から BLAS/LAPACK シンボルがエクス ポートされるため, MKL インポートライブラリのパスは必要ありません. 最後のコマンド は, NAG の BLAS/LAPACK を含む NAG DLL (FLW3226DE_nag.dll) を利用する場合です. /MD オプションは正しいランタイムライブラリ (マルチスレッド DLL ランタイムライブラ リ) とのリンクを指示するために必要です.

/MT オプションは /libs:static /threads オプションと等価です. /MD オプションは /libs:dll /threads オプションと等価です. Intel Visual Fortran コンパイラの環境変数の設定にもご注意ください. 詳細はコンパイラの Users' Guide をご参照ください.

3.1.2. Microsoft Visual Studio

本セクションの説明は Visual Studio 2015 および Intel Fortran Compiler 16.0 を想定 しています. 他のバージョンでは詳細が異なるかもしれません.

Visual Studio がビルド時と実行時に NAG インターフェースブロックファイルとライブラ リにアクセスできるように、環境変数 PATH, LIB, INCLUDE に適切な値が設定されている 必要があります. NAG ライブラリのインストール時に、これらの環境変数の更新を許可し た場合は、必要な設定は既に行われています. そうでない場合は、実行時に NAG DLL (FLW3226DE_mk1.dll/FLW3226DE_nag.dll) にアクセスできるように、NAG DLL の格納フ ォルダー install_dir¥bin を環境変数 PATH に設定してください. 更に、MKL を利用する NAG DLL (FLW3226DE_mk1.dll) の使う場合は、実行時に MKL DLL にアクセスできるよう に、MKL DLL の格納フォルダー install_dir¥mkl_ia32_11.3.3¥bin を環境変数 PATH に設 定してください. この時、install_dir¥mkl_ia32_11.3.3¥bin は install_dir¥bin の後ろ に設定してください.

本ライブラリは最大最適化されています. そのため Debug モードだと C ランタイムライ ブラリについての警告メッセージが表示されますが, 通常これは無視して構いません. Release モードではこの警告メッセージは出力されません. Release モードへの変更は, ツールバーもしくはメニューの「ビルド > 構成マネージャー」から行うことができます.

本ライブラリは 32-bit ライブラリです. 64-bit システムで実行する場合は,「構成マネ ージャー」の「プラットフォーム」を "x86" に設定してください.

Intel Fortran プロジェクトに NAG ライブラリを追加する手順を以下に示します.

- プロジェクトのプロパティページを開いてください.
 プロパティページは次のいずれかの操作で開くことができます.
 - ソリューションエクスプローラーでプロジェクトを選択して、
 メニュー「プロジェクト > プロパティ」を選択してください.
 - ソリューションエクスプローラーでプロジェクトを右クリックして、
 「プロパティ」を選択してください.
 - ソリューションエクスプローラーでプロジェクトを選択して、
 ツールバーの「プロパティウィンドウ」ボタンを選択してください.
 「プロパティ」ウィンドウの「プロパティページ」アイコンを選択してください.

 プロパティページの左パネルから「構成プロパティ > Fortran > 全般」を選択して ください. 右パネルの「追加のインクルード・ディレクトリー」に、フォルダー

install_dir¥nag_interface_blocks

を設定してください. デフォルトでは,

C:\Program Files\NAG\FL26\flw3226del\nag_interface_blocks

プロパティページの左パネルから「構成プロパティ > リンカー > 全般」を選択してください. 右パネルの「追加のライブラリディレクトリ」に、3つのフォルダー

install_dir¥lib
install_dir¥mkl_ia32_11.3.3¥lib
install_dir¥rtl¥lib

を設定してください. デフォルトでは,

C:¥Program Files¥NAG¥FL26¥flw3226del¥lib C:¥Program Files¥NAG¥FL26¥flw3226del¥mkl_ia32_11.3.3¥lib C:¥Program Files¥NAG¥FL26¥flw3226del¥rtl¥lib

また, libucrt.lib ファイルの格納場所を加える必要があるかもしれません. (例えば, Windows 10 では, 一般的には以下のような場所にありますが, C:¥Program Files (x86)¥Windows Kits¥10¥Lib¥10.0.10240.0¥ucrt¥x86 これは, ご利用のシステムに依って変わります.また, Windows の古いバージョンで は, 適切な Windows アップデートをインストールする必要があるかもしれません.)

- 4. プロパティページの左パネルから「構成プロパティ > リンカー > 入力」を選択してください.右側のパネルの「追加の依存ファイル」に、例えば MKL を利用する NAGスタティックライブラリ nag_mkl_MT.lib をご利用になる場合は、6つのライブラリ nag_mkl_MT.lib mkl_intel_c.lib mkl_intel_thread.lib mkl_core.lib libiomp5md.lib user32.lib を追加してください.各ライブラリの名前をスペースで区切ることに注意してください.また、nag_mkl_MT.lib を最初に置く必要があります.変更を有効にするために「適用」ボタンをクリックしてください.もし、MKL を利用しない NAG スタティックライブラリ nag_nag_MT.lib をご利用になる場合は、上記の6つのライブラリの代わりに、2つのライブラリ nag_nag_MT.lib user32.lib を追加してください.同様に、ご利用の NAG ライブラリに依って、適切なライブラリを「追加の依存ファイル」に追加してください.(以下の表をご参照ください.)
- 5. 最後に、正しいランタイムライブラリを指定する必要があります. プロパティページの左パネルから「構成プロパティ > Fortran > ライブラリー」を選択してください. 右パネルの「ランタイム・ライブラリー」において、nag_nag_MT. lib またはnag_mkl_MT. lib をご利用の場合は「マルチスレッド」を選択し、その他の NAG ライブラリをご利用の場合は「マルチスレッド DLL」を選択してください. 変更を有効にするために「適用」ボタンをクリックしてください.
- 6. 「OK」ボタンをクリックして、プロパティページを閉じてください.

以下の表に設定を要約します.

追加の依存ファイル	ランタイム・ライブラリー	環境変数 PATH
nag_mkl_MT.lib mkl_intel_c.lib mkl_intel_thread.lib mkl_core.lib libiomp5md.lib user32.lib	マルチスレッド	_
nag_nag_MT.lib user32.lib	マルチスレッド	_
nag_mkl_MD.lib mkl_intel_c.lib mkl_intel_thread.lib mkl_core.lib libiomp5md.lib user32.lib	マルチスレッド DLL	_
nag_nag_MD.lib user32.lib	マルチスレッド DLL	_
FLW3226DE_mkl.lib	マルチスレッド DLL	install_dir¥bin install_dir¥ mkl_ia32_11.3.3¥bin
FLW3226DE_nag.lib	マルチスレッド DLL	install_dir¥bin

以上で、プロジェクトのビルド(コンパイル/リンク)を行うことができます。

Microsoft Development Environment 上でのプログラムの実行は、「デバッグ」メニュー (例えば,「デバックなしで開始 (Ctrl+F5)」など) から行うことができます.

プログラムの実行に入出カリダイレクションが伴う場合は、プロパティページの「構成 プロパティ > デバッグ」から「コマンド引数」に適切なコマンドを指定してください. 例えば、

< input_file > output_file

アプリケーションの作業フォルダー以外で入出力を行う場合は、フルパスもしくは相対 パスでファイルを指定する必要があります. 作業フォルダーの設定は、プロパティペー ジの「構成プロパティ > デバッグ」から「作業ディレクトリ」で行うことができます.

3.1.3. モジュールファイルについて

Install_dir¥nag_interface_blocks フォルダーに提供されるモジュールファイル (*.mod)は、Intelコンパイラ(ifort)を用いて生成されています. モジュールファイ ルはコンパイラ依存のファイルであるため、他のコンパイラではご利用いただけません. 他のコンパイラでご利用の場合は、ご利用のコンパイラでモジュールファイルを生成す る必要があります.(自身のプログラムでインターフェースブロックをご利用にならな いのであれば必要ありません.ただし、Example プログラムはインターフェースブロック を利用しますので、Example プログラムをご利用になる場合は必要です.) 詳細は「3.2. インターフェースブロック」をご参照ください.

3.1.4. Microsoft C/C++ または Intel C/C++

本ライブラリは C または C++ 環境からもご利用いただけます. ご利用の支援として Fortran と C の間の型マッピング情報を持った C/C++ ヘッダーファイル nagmk26.h が提 供されます. ヘッダーファイルから必要な部分だけを(ファイルの先頭にある #defines なども忘れずに)自身のプログラムにコピー&ペーストするか, もしくはヘッダーファ イルを単純にインクルードしてご利用ください.

C または C++ から本ライブラリの DLL 版(以下 NAG DLL と呼ぶ)を利用する Example が 以下のフォルダーに提供されます.

install_dir¥samples¥c_examples

および,

install_dir¥samples¥cpp_examples

C または C++ から NAG DLL を呼び出す際のより詳細なアドバイスは, ドキュメント install_dir/c_headers/techdoc.html をご参照ください. なお, このドキュメントのシ ョートカットがスタートメニューの NAG Fortran Library (FLW3226DEL) に提供されます.

Calling NAG FLW3226DEL from C & C++

キーとなる情報:

- 配列のアクセス順序が異なる.
 Cは行優先 (Row Major), Fortranは列優先 (Column Major) である.
- 提供されるヘッダーファイルを利用する.
- Fortranの文字列は二つのパラメーターとして扱われる(文字列と文字列長).
- Cから NAG DLL を利用する Example が提供される.

install_dir¥samples¥c_examples

• C++ から NAG DLL を利用する Example が提供される.

install_dir¥samples¥cpp_examples

● C プログラムは.c 拡張子, C++ プログラムは.cpp 拡張子を用いる.

C プログラムから NAG DLL をご利用になる場合は, NAG DLL インポートライブラリの格納 フォルダーのパスが環境変数 LIB に設定されていることが前提となります. 以下のよう にコンパイル/リンクを行ってください. ここで driver.c がユーザープログラムです. (以下のコマンドは Microsoft C コンパイラ (cl)を使用しています. Microsoft C コン パイラは, 例えば, VS2015 x86 Native Tools Command Prompt から利用できます.)

cl driver.c FLW3226DE_mkl.lib

または,

cl driver.c FLW3226DE_nag.lib

上記のコマンドはヘッダーファイルの格納フォルダーのパスが環境変数 INCLUDE に設定 されていることを前提としています. このパスが設定されていない場合は、以下のよう にコンパイル/リンクを行ってください.

cl /I"install_dir¥c_headers" driver.c FLW3226DE_mkl.lib

または,

cl /I"install_dir¥c_headers" driver.c FLW3226DE_nag.lib

NAG DLL の代わりに NAG スタティックライブラリをリンクする場合は、コンパイラのラン タイムライブラリの格納フォルダー install_dir¥rtl¥lib へのアクセスが必要となりま す. このフォルダーのパスが環境変数 LIB に設定されていることを前提として、以下の ようにコンパイル/リンクを行ってください. cl /MD /I"install_dir¥c_headers" driver.c nag_nag_MD.lib \
 libifcoremd.lib user32.lib

または,

cl /MT /I"install_dir¥c_headers" driver.c nag_nag_MT.lib \
 libifcoremt.lib user32.lib

ここでは,実行時の問題を回避するために, Intel コンパイラのランタイムライブラリ libifcoremd.lib および libifcoremt.lib が指定されていることに注意してください. これらのランタイムライブラリは,スタティックライブラリを Microsoft C コンパイラ で使用するときに必要です.

MKL を利用するバージョンの NAG スタティックライブラリ nag_mkl_MD.lib または nag_mkl_MT.lib をリンクする場合は, いくつかのライブラリを追加する必要があります. 詳細は「3.1.1. コマンドウィンドウ」をご参照ください.

Intel C コンパイラ (icl) でのご利用方法は、上記の Microsoft C コンパイラ (cl) で のご利用方法と同じです. ただし、環境変数 LIB に install_dir¥rtl¥lib フォルダーの パスを設定する必要はありません.

以下の説明は Visual Studio 2015 を想定しています. 他のバージョンでは詳細が異なる かもしれません.

Visual Studio から NAG ライブラリを利用する場合は、以下のようにリンカーの設定を行ってください. プロジェクトのプロパティを開き、「構成プロパティ > リンカー > 入力」の「追加の依存ファイル」に FLW3226DE_mkl.lib または FLW3226DE_nag.lib を追加してください.次に、「構成プロパティ > リンカー > 全般」の「追加のライブラリディレクトリ」に install_dir¥rtl¥lib を追加してください. 最後に、「C/C++ > 全般」の「追加のインクルードディレクトリ」に install_dir¥c_headers を追加するか、もしくは、ソリューションエクスプローラーの「ヘッダーファイル」フォルダーに nagmk26.h を追加してください.

注意 : C++ Example (install_dir¥samples¥cpp_examples) を Microsoft C++ で利用する 場合は, コンパイラオプション /EHsc が必要です.

3.1.5. Fortran Builder

本ライブラリの DLL 版(以下 NAG DLL と呼ぶ)は, Fortran Builder (NAG Fortran コン パイラ)から以下の2つの方法でご利用いただけます.

Fortran Builder :

Fortran Builder からご利用になる場合は、以下のように手動で本ライブラリのリンク設定を行ってください。

- 1. 「コンソールアプリケーション」プロジェクトを新規作成する.
- 2. メニューバーから「プロジェクト > プロジェクトの設定」を開く.
- 3. 「基本設定 > ビットモード」を "32-bit" に設定する.
- 4. 「ディレクトリ > インクルード」タブを開く.
- 「インクルード」にフォルダー, install_dir¥nag_interface_blocks_nagfor を追加する.

注意:パスにスペースが含まれていても、クォテーションで括らないでください.

6. 「リンク 〉 基本設定」タブを開く.

- 「リンクするライブラリ」に NAG DLL のインポートライブラリ, install_dir¥lib¥FLW3226DE_mkl.lib もしくは, install_dir¥lib¥FLW3226DE_nag.lib を追加する.
- 8. 「OK」ボタンを押し、プロジェクトの設定を閉じる.

以上で NAG DLL (FLW3226DE_mk1.dll または FLW3226DE_nag.dll) を利用したプロジェク トをビルド/実行することができます. 注意:「Fortran コンパイラ > 実行時診断」タブの「未定義の変数(=undefined)」オプ ションは、本ライブラリと互換性がありません. もし、このオプションにチェックを入 れてビルドすると、コンパイルエラーとなります.

コマンドウィンドウ:

コマンドウィンドウからご利用になる場合は, 「3.1.1. コマンドウィンドウ」と同じく 環境変数 PATH が正しく設定されていることを確認してください.

NAG Fortran コンパイラを用いて生成されたインターフェースブロックのモジュールフ ァイル (*.mod) が, install_dir¥nag_interface_blocks_nagfor フォルダーに提供され ます. もし, 異なるバージョンの NAG Fortran コンパイラでご利用になる場合は, モジ ュールファイルを再生成する必要があります(「3.2. インターフェースブロック」参照).

以下に示すコマンドでコンパイル/リンクを行ってください. (ここで driver. f90 がユーザープログラムです.)

MKL を利用する NAG DLL (FLW3226DE_mk1.dll) を利用する場合:

nagfor -abi=32 -ieee=full -I"install_dir¥nag_interface_blocks_nagfor" driver.f90 "install_dir¥lib¥FLW3226DE_mkl.lib" -o driver.exe

MKL を利用しない NAG DLL (FLW3226DE_nag. dll) を利用する場合:

nagfor -abi=32 -ieee=full -I"install_dir¥nag_interface_blocks_nagfor" driver.f90 "install_dir¥lib¥FLW3226DE_nag.lib" -o driver.exe

NAG DLL のインポートライブラリ (FLW3226DE_mk1. | ib または FLW3226DE_nag. | ib) は, フルパスで指定してください. また, パスがスペースを含む場合は, クォテーションで 括る必要があります.

3.1.6. その他の環境

その他の環境からの本ライブラリのご利用については、以下の追加情報ページをご参照 ください.

http://www.nag.co.uk/doc/inun/fl26/w32del/supplementary.html

3.2. インターフェースブロック

NAG Fortran Library インターフェースブロック(引用仕様宣言)はライブラリルーチン の型と引数を定義します.Fortran プログラムからライブラリルーチンを呼び出す際に必 ず必要という性質のものではありませんが(ただし本製品で提供される Example を利用 する際には必要となります),これを用いることでライブラリルーチンが正しく呼び出さ れているかどうかのチェックを Fortran コンパイラに任せる事ができます.具体的には コンパイラが以下のチェックを行うことを可能とします.

- (a) サブルーチン呼び出しの整合性
- (b) 関数宣言の型
- (c) 引数の数
- (d) 引数の型

NAG Fortran Library インターフェースブロックファイルはチャプター毎のモジュールと して提供されますが、これらをまとめて一つにしたモジュールが提供されます.

nag_library

これらのモジュールは Intel Fortran コンパイラ (ifort) を用いてプリコンパイルされ た形式 (*. mod ファイル) で提供されます.

本ライブラリのコマンドプロンプト(スタートメニューのショートカットとして提供される)を利用する場合,もしくはバッチファイル envvars.bat を実行して環境変数の設 定を行った場合は,環境変数 INCLUDE があらかじめ設定されるため,「3.1.1. コマンド ウィンドウ」で示されるコマンドでこれらのモジュールにアクセスすることができます.

提供されるモジュールファイル (.mod ファイル) は、インストールノートの「2.2. 開発 環境」に記載されているコンパイラを用いて生成されています. モジュールファイルは コンパイラ依存のファイルであるため、ご利用のコンパイラとの間に互換性がない場合 は、ご利用のコンパイラでモジュールファイルを以下のような方法で再生成する必要が あります.(自身のプログラムでインターフェースブロックをご利用にならないのであ れば、この限りではありません.ただし、Example プログラムはインターフェースブロッ クを利用しますので、Example プログラムをご利用になる場合は必要です.) オリジナルのモジュールファイルのバックアップのために、任意の場所に任意の名前で (例えば, nag_interface_blocks_original)フォルダーを作成し, nag_interface_blocks フォルダーの内容物をそのフォルダーにコピーしてください.

そして, nag_interface_blocks フォルダーにおいて, すべての *.f90 ファイルをご利用 の Fortran コンパイラでコンパイルしてください. その際, インターフェースブロック には依存関係があるため, コンパイルの順番が重要となります. 以下に示す順番でコン パイルを行ってください. (FCOMP をご利用のコンパイラ名で置き換えてください.)

```
FCOMP -c nag_precisions.f90
FCOMP -c nag_a_ib.f90
FCOMP -c nag_blast_ib.f90
FCOMP -c nag_blas_consts.f90
FCOMP -c nag_blas_ib.f90
FCOMP -c nag_c_ib.f90
FCOMP -c nag d ib. f90
FCOMP -c nag_e_ib.f90
FCOMP -c nag_f_ib.f90
FCOMP -c nag_g_ib.f90
FCOMP -c nag_h_ib.f90
FCOMP -c nag_lapack_ib.f90
FCOMP -c nag_m_ib.f90
FCOMP -c nag_s_ib.f90
FCOMP -c nag_x_ib.f90
FCOMP -c nag_long_names.f90
FCOMP -c nag_library.f90
```

コンパイルによって生成されるオブジェクトファイルは必要ありません. モジュールファイル(*.mod ファイル)だけをご利用ください.

3.3. Example プログラム

提供される Example 結果は, nag_mkl_MD. lib (MKL BLAS/LAPACK ルーチンを利用する NAG スタティックライブラリ)を用いて、インストールノートの「2.2. 開発環境」に記載されている環境で生成されています. Example プログラムの実行結果は異なる環境下(例えば, 異なる Fortran コンパイラ, 異なるコンパイラライブラリ, 異なる BLAS または LAPACK ルーチンなど)で若干異なる場合があります. そのような違いが顕著な計算結果としては、固有ベクトル (スカラー (多くの場合 -1) 倍の違い)、反復回数や関数評価、残差 (その他マシン精度と同じくらい小さい量) などがあげられます.

Example プログラムは本ライブラリが想定する動作環境に適した状態で提供されます. そのため、ライブラリマニュアルに記載/提供されている Example プログラムに比べて、その内容が若干異なる場合があります.

install_dir¥batch フォルダーに3つのバッチファイル nag_example_DLL.bat, nag_example_static_MT.bat, nag_example_static_MD.bat が提供されます.

これらのバッチファイルを用いて Example プログラムを簡単に利用する事ができます. これらのバッチファイルは, Example プログラムのソースファイル(必要に応じて, デー タファイル,オプションファイルその他)をカレントフォルダーにコピーして,コンパ イル/リンク/実行を行います.

これらのバッチファイルをご利用の際には、Fortran コンパイラと NAG ライブラリに対し て必要な環境変数が設定されていなければなりません. 特に、環境変数 NAG_FLW3226DEL に本ライブラリのインストール先(例えば、C:¥Program Files¥NAG¥FL26¥flw3226del) が設定されている必要があります.

ご利用の NAG ライブラリルーチンの名前をバッチの引数に指定してください. 例)

nag_example_DLL e04nrf

この例では, e04nrfe.f90 (ソースファイル), e04nrfe.d (データファイル), e04nrfe.opt (オプションファイル)をカレントフォルダーにコピーして, コンパイル/リンク/実行を行い e04nrfe.r (結果ファイル)を生成します. nag_example_DLL.bat

FLW3226DE_nag.dll (NAG BLAS/LAPACK を利用する NAG DLL ライブラリ) をリンクします. 例) nag_example_DLL eO4nrf

FLW3226DE_mkl.dll (MKL BLAS/LAPACK を利用する NAG DLL ライブラリ) をリンクする場合は -mkl オプションを付けてください. 例) nag_example_DLL -mkl e04nrf

nag_example_static_MD.bat

nag_nag_MD.lib (NAG BLAS/LAPACK を利用する NAG スタティックライブラリ (/MD)) をリンクします. 例) nag_example_static_MD eO4nrf

nag_mkl_MD.lib (MKL BLAS/LAPACK を利用する NAG スタティックライブラリ (/MD)) をリンクする場合は -mkl オプションを付けてください. 例) nag_example_static_MD -mkl eO4nrf

nag_example_static_MT.bat

nag_nag_MT.lib (NAG BLAS/LAPACK を利用する NAG スタティックライブラリ (/MT)) をリンクします. 例) nag_example_static_MT eO4nrf

nag_mkl_MT.lib (MKL BLAS/LAPACK を利用する NAG スタティックライブラリ (/MT)) をリンクする場合は -mkl オプションを付けてください. 例) nag_example_static_MT -mkl eO4nrf

3.4. Fortran型と強調斜体文字の解釈

本ライブラリは 32-bit 整数を使用します.

ライブラリとライブラリマニュアルでは浮動小数点変数を以下のようにパラメーター化 された型を用いて記述しています.

REAL (KIND=nag_wp)

ここで nag_wp は Fortran の種別パラメーターを表しています. nag_wp の値は製品毎に異なり、その値は nag_library モジュールに定義されています.

これに加え、いくつかのルーチンで以下の型が使用されます.

REAL(KIND=nag_rp)

これらの型の使用例については、各種 Example プログラムをご参照ください.

本ライブラリでは、これらの型は次のような意味を持っています.

REAL	(kind=nag_rp)	_	REAL(単精度実数)
REAL	(kind=nag_wp)	-	DOUBLE PRECISION (倍精度実数)
COMPL	EX (kind=nag_rp)	-	COMPLEX(単精度複素数)
COMPL	EX (kind=nag_wp)	_	倍精度複素数(e.g. COMPLEX*16)

上記に加え、ライブラリマニュアルでは強調斜体文字を用いていくつかの用語を表現しています. 詳細は "How to Use the NAG Library and its Documentation" ドキュメントの「4.4 実装依存情報」をご参照ください.

3.5. メンテナンスレベル

ライブラリのメンテナンスレベルは、ライブラリルーチン A00AAF の Example プログラム をコンパイル/リンク/実行することにより確認することができます. この時, バッチ ファイル nag_example_DLL. bat を引数 a00aaf と共に用いれば, Example プログラムのコ ンパイル/リンク/実行を容易に行うことができます(「3.3. Example プログラム」参照). ライブラリルーチン A00AAF はライブラリの詳細(タイトル、製品コード, 使用されるコ ンパイラおよび精度, バージョン (Mark) など)を出力します.

または、診断プログラム NAG_Fortran_DLL_info.exe を利用することもできます. 診断プログラムはその中で A00AAF を呼び出します.

(インストールノートの「4.2.2. アクセスチェック」参照)

4. ルーチン固有の情報

本ライブラリルーチン固有の情報を(チャプター毎に)以下に示します.

a. F06, F07, F08, F16

多くの LAPACK ルーチンは "workspace query" メカニズムを利用します. ルーチン呼び 出し側にどれだけのワークスペースが必要であるかを問い合わせるメカニズムですが, NAG 提供の LAPACK と MKL 提供の LAPACK ではこのワークスペースサイズが異なる場合があ るので注意してください.

b. S07 - S21

これらのチャプターの関数の動作は、ライブラリ実装毎に異なります.

ー般的な詳細はライブラリマニュアルをご参照ください. 本ライブラリ固有の値を以下に示します.

S07AAF $F_1 = 1.0E+13$ $F_2 = 1.0E-14$ S10AAF $E_1 = 1.8715E+1$ S10ABF $E_1 = 7.080E+2$ S10ACF $E_1 = 7.080E+2$ S13AAF $x_hi = 7.083E+2$ S13ACF $x_hi = 1.0E+16$ S13ADF $x_hi = 1.0E+17$ S14AAF IFAIL = 1 if X > 1.70E+2 IFAIL = 2 if X < -1.70E+2 IFAIL = 3 if abs(X) < 2.23E-308 S14ABF IFAIL = 2 if X > $x_big = 2.55E+305$ S15ADF $x_hi = 2.65E+1$ S15ADF $x_hi = 2.65E+1$

 $S15AEF x_hi = 2.65E+1$

S15AGF IFAIL = 1 if X >= 2.53E+307 IFAIL = 2 if 4.74E+7 <= X < 2.53E+307 IFAIL = 3 if X < -2.66E+1S17ACF IFAIL = 1 if X > 1.0E+16S17ADF IFAIL = 1 if X > 1.0E+16IFAIL = 3 if $0 < X \le 2.23E-308$ S17AEF IFAIL = 1 if abs(X) > 1.0E+16S17AFF IFAIL = 1 if abs(X) > 1.0E+16S17AGF IFAIL = 1 if X > 1.038E+2IFAIL = 2 if X < -5.7E+10S17AHF IFAIL = 1 if X > 1.041E+2IFAIL = 2 if X < -5.7E+10S17AJF IFAIL = 1 if X > 1.041E+2IFAIL = 2 if X < -1.9E+9S17AKF IFAIL = 1 if X > 1.041E+2IFAIL = 2 if X < -1.9E+9S17DCF IFAIL = 2 if abs(Z) < 3.92223E-305IFAIL = 4 if abs(Z) or FNU+N-1 > 3.27679E+4 IFAIL = 5 if abs(Z) or FNU+N-1 > 1.07374E+9 S17DEF IFAIL = 2 if AIMAG(Z) > 7.00921E+2 IFAIL = 3 if abs(Z) or FNU+N-1 > 3.27679E+4 IFAIL = 4 if abs(Z) or FNU+N-1 > 1.07374E+9 S17DGF IFAIL = 3 if abs(Z) > 1.02399E+3IFAIL = 4 if abs(Z) > 1.04857E+6S17DHF IFAIL = 3 if abs(Z) > 1.02399E+3IFAIL = 4 if abs(Z) > 1.04857E+6S17DLF IFAIL = 2 if abs(Z) < 3.92223E-305IFAIL = 4 if abs(Z) or FNU+N-1 > 3.27679E+4 IFAIL = 5 if abs(Z) or FNU+N-1 > 1.07374E+9 S18ADF IFAIL = 2 if $0 < X \le 2.23E-308$ S18AEF IFAIL = 1 if abs(X) > 7.116E+2S18AFF IFAIL = 1 if abs(X) > 7.116E+2S18DCF IFAIL = 2 if abs(Z) < 3.92223E-305IFAIL = 4 if abs(Z) or FNU+N-1 > 3.27679E+4

```
IFAIL = 5 \text{ if } abs(Z) \text{ or } FNU+N-1 > 1.07374E+9
S18DEF IFAIL = 2 \text{ if } REAL(Z) > 7.00921E+2
IFAIL = 3 \text{ if } abs(Z) \text{ or } FNU+N-1 > 3.27679E+4
IFAIL = 4 \text{ if } abs(Z) \text{ or } FNU+N-1 > 1.07374E+9
S19AAF IFAIL = 1 \text{ if } abs(X) >= 5.04818E+1
S19AAF IFAIL = 1 \text{ if } abs(X) >= 5.04818E+1
S19AF IFAIL = 1 \text{ if } abs(X) >= 5.04818E+1
S19ACF IFAIL = 1 \text{ if } X > 9.9726E+2
S19ADF IFAIL = 1 \text{ if } X > 9.9726E+2
S21BCF IFAIL = 3 \text{ if an argument} < 1.583E-205
IFAIL = 4 \text{ if an argument} >= 3.765E+202
S21BDF IFAIL = 3 \text{ if an argument} < 2.813E-103
IFAIL = 4 \text{ if an argument} >= 1.407E+102
```

c. X01

数学定数は以下のとおりです.

X01AAF (pi) = 3. 1415926535897932 X01ABF (gamma) = 0. 5772156649015328

d. X02

マシン定数は以下のとおりです.

浮動小数点演算の基本的なパラメーター:

XO2BHF = 2 XO2BJF = 53 XO2BKF = -1021XO2BLF = 1024

浮動小数点演算の派生的なパラメーター:

X02AJF = 1.11022302462516E-16 X02AKF = 2.22507385850721E-308 X02ALF = 1.79769313486231E+308 X02AMF = 2.22507385850721E-308 X02ANF = 2.22507385850721E-308

コンピューター環境のその他のパラメーター:

X02AHF = 1.42724769270596E+45 X02BBF = 2147483647 X02BEF = 15

e. X04

エラーメッセージおよびアドバイスメッセージのデフォルトの出力先装置番号は 6 番となります.

5. ドキュメント

ライブラリマニュアルは本製品の一部として提供されます. また, NAGのウェブサイトからダウンロードすることもできます. ライブラリマニュアルの最新版は以下のウェブサイトをご参照ください.

http://www.nag.co.uk/content/nag-fortran-library-manual

ライブラリマニュアルは以下の形式で提供されます.

- HTML5 HTML/MathML マニュアル(各ドキュメントの PDF 版へのリンクを含む)
- PDF PDF マニュアル (PDF のしおり, または HTML 目次ファイルから閲覧する)

これらの形式に対して、以下の目次ファイルが提供されます.

nagdoc_fl26\u00e4html\u00e4frontmatter\u00e4manconts.html
nagdoc_fl26\u00e4pdf\u00e4frontmatter\u00e4manconts.pdf
nagdoc_fl26\u00e4pdf\u00e4frontmatter\u00e4manconts.html

ライブラリマニュアルをインストールした場合,これらの目次ファイルはスタートメニ ューの NAG Mark 26 Manual にある以下のショートカットから開くことができます.

NAG Library Manual Mark 26 (HTML5) NAG Library Manual Mark 26 (PDF) NAG Library Manual Mark 26 (PDF + HTML Index)

また,これらの目次ファイルへのリンクをまとめたマスター目次ファイルが提供されま す.

nagdoc_fl26¥index.html

各形式の閲覧方法および操作方法については、以下のドキュメントをご参照ください.

http://www.nag.co.uk/numeric/fl/nagdoc_fl26/html/genint/essint.html

また、以下のウェブサイトから、HTML ヘルプ形式のライブラリマニュアルをダウンロー ドすることができます.

http://www.nag.co.uk/content/nag-fortran-library-manual

加えて、以下のドキュメントが提供されます.

- in. html インストールノート(英語版)
- un. html ユーザーノート(英語版)

ユーザーノート(英語版)は、スタートメニューの NAG Fortran Library (FLW3226DEL)に ある以下のショートカットから開くことができます.

NAG FLW3226DEL Users' Note

6. サポート

製品のご利用に関してご質問等がございましたら,電子メールにて「日本 NAG ヘルプデ スク」までお問い合わせください. その際,ご利用の製品の製品コード(FLW3226DEL) 並びに,お客様のUser ID をご明記いただきますようお願い致します. ご返答は平日9:30~12:00, 13:00~17:30 に行わせていただきます.

<u>日本 NAG ヘルプデスク</u>

Email: <u>naghelp@nag-j.co.jp</u>

7. コンタクト情報

日本ニューメリカルアルゴリズムズグループ株式会社(日本 NAG)

〒104-0032

東京都中央区八丁堀 4-9-9 八丁堀フロンティアビル 2F

Email: <u>sales@nag-j.co.jp</u>

Tel: 03-5542-6311

Fax: 03-5542-6312

NAGのウェブサイトでは製品およびサービスに関する情報を定期的に更新しています.

<u>http://www.nag-j.co.jp/</u> (日本) <u>http://www.nag.co.uk/</u> (英国本社) <u>http://www.nag.com/</u> (米国)